

RECHERCHE COOPÉRATIVE SUR PROGRAMME N° 25

R. BALIAN

Distribution des valeurs propres d'équations d'ondes à plusieurs dimensions

Les rencontres physiciens-mathématiciens de Strasbourg - RCP25, 1973, tome 15
« Conférences de : R. Balian, H.J. Borchers, J.J. Duistermaat J.P. Eckmann, H. Goldschmidt et C.V. Stanojević », , exp. n° 1, p. 1-14

http://www.numdam.org/item?id=RCP25_1973__15__A1_0

© Université Louis Pasteur (Strasbourg), 1973, tous droits réservés.

L'accès aux archives de la série « Recherche Coopérative sur Programme n° 25 » implique l'accord avec les conditions générales d'utilisation (<http://www.numdam.org/conditions>). Toute utilisation commerciale ou impression systématique est constitutive d'une infraction pénale. Toute copie ou impression de ce fichier doit contenir la présente mention de copyright.

NUMDAM

Article numérisé dans le cadre du programme
Numérisation de documents anciens mathématiques
<http://www.numdam.org/>

DISTRIBUTION DES VALEURS PROPRES D'EQUATIONS D'ONDES

A PLUSIEURS DIMENSIONS.

R. BALIAN.

INTRODUCTION.

On expose ici les idées principales d'un travail effectué en collaboration avec C. BLOCH (*), dont le but est la détermination systématique de la distribution des modes d'équations aux valeurs propres. Pour fixer les idées, nous parlerons surtout d'équations d'ondes scalaires à 3 dimensions, dans des domaines V de forme quelconque,

$$(\Delta + E_n)\Psi_n(\mathbf{r}) = 0 \quad (1)$$

(où la fonction d'onde s'annule à la frontière S), décrivant par exemple les modes acoustiques dans une cavité. Ces considérations se généralisent facilement à des ondes électro-magnétiques (corps noirs finis), et s'appliquent aussi à des modèles simples de photons ou d'électrons dans des petits grains métalliques. L'extension à l'équation de Schrödinger est utile pour décrire des systèmes de particules indépendantes dans un potentiel (électrons dans le potentiel cristallin pour l'étude de phénomènes du type de Haas-Van Alphen, nucléons dans un noyau très déformé en théorie de la fission). On examinera à la fin de cet exposé le cas de l'équation de Schrödinger (modèles plus réalistes du noyau ; atomes et molécules).

Du point de vue mathématique, le premier résultat fondamental est celui de Weyl : le nombre $\eta(E)$ de niveaux, d'énergie E_n inférieure à E , se comporte pour E grand comme

$$\eta(E) \sim \frac{V E^{3/2}}{6\pi^2}, \quad (2)$$

(*) *Annals of Phys.* 60 (1970) 401, 63 (1971) 592, 64 (1971) 271, 69 (1972) 76 est en préparation.

On se reportera à ces articles pour la bibliographie, les figures et les développements.

indépendamment de la forme du domaine (application à la mécanique statistique). Les mathématiciens ont depuis cherché à généraliser ce résultat, en essayant en particulier construire un développement asymptotique dont (2) serait le premier terme. Ils se sont heurtés à une difficulté : $\eta(E)$, somme de fonctions échelons, présente des sauts et son développement asymptotique ne peut comprendre que des termes en $E^{3/2}$, E , $E^{1/2}$. Pire, si les niveaux E_n se groupent (dégénérescences dues à une invariance, dégénérescences accidentelles, ou quasi-dégénérescences), les sauts peuvent être plus grands, ce qui supprime l'existence même d'un développement asymptotique. En fait, on a montré que seul le deuxième terme (en E) du développement asymptotique de $\eta(E)$ existe. Par ailleurs, des calculs numériques (effectués dans le cadre de la physique nucléaire) ont montré que le phénomène de groupement des niveaux ("effet de couche") semble général, et existe pour des domaines V n'ayant aucune propriété d'invariance.

Notre but est double :

- construire un développement asymptotique ayant un sens, en éliminant les sauts brusques,

- étudier le groupement des niveaux, et calculer pratiquement leur distribution. On va en particulier montrer l'existence d'oscillations régulières dans la densité de niveaux.

LISSAGE.

La densité de valeurs propres

$$\rho(E) = \sum_n \delta(E - E_n), \quad (3)$$

dont $\eta(E)$ est la primitive, n'est pas une fonction. Ce qui intéresse en fait le physicien lorsque les niveaux sont denses, est la bonne fonction $\rho_\gamma(E)$, obtenue en lissant $\rho(E)$ par une fonction $f_\gamma(E)$, centrée autour de $E = 0$ et ayant une largeur γ :

$$\rho_{\gamma}(E) = \sum_n f_{\gamma}(E - E_n) . \quad (4)$$

Si γ est grand devant la distance moyenne entre niveaux, ρ_{γ} sera une fonction lisse, sans pics autour des valeurs E_n . C'est elle qu'on va chercher à approximer.

On obtiendra un développement asymptotique (pour E grand) pour $\rho_{\gamma}(E)$, si γ est assez grand pour lisser non seulement les niveaux individuels, mais aussi les paquets de niveaux.

En prenant γ moins grand, on pourra explorer des détails de structure du spectre, en particulier étudier le groupement des niveaux.

UTILISATION DE LA FONCTION DE GREEN.

La fonction de Green $G(r, r'; z)$ associée au problème aux valeurs propres considéré,

$$G(r, r'; z) = \sum_n \psi_n(r) \frac{1}{E_n - z} \psi_n^*(r') , \quad (5)$$

est solution de l'équation

$$(\Delta + z)G(r, r'; z) = -\delta^3(r - r') . \quad (6)$$

On en déduit la densité de valeurs propres :

$$\rho(E) = \frac{1}{\pi} \int_V d^3r \operatorname{Im} G(r, r; E + i0) , \quad (7)$$

ainsi que $\rho_{\gamma}(E)$. En particulier si on choisit pour $f_{\gamma}(E)$ la forme de Lorentz (ou Breit et Wigner)

$$f_{\gamma}(E) = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma}{E^2 + \Gamma^2} = \frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \frac{1}{E - i\Gamma} , \quad (8)$$

on a

$$\rho_{\gamma}(E) = \frac{1}{\pi} \int_V d^3r \operatorname{Im} G(r, r; E + i\Gamma) . \quad (9)$$

Plus généralement, si la fonction de lissage $f_\gamma(E)$ s'approche par une fonction méromorphe de E , $\rho_\gamma(E)$ s'exprime en termes de la fonction de Green prise aux poles de f_γ , c'est à dire à une distance de l'axe réel (en z) de l'ordre de γ .

Il est difficile de déterminer G près de l'axe réel où elle a ses poles E_n , aussi difficile que de résoudre l'équation aux valeurs propres (1). Mais on peut espérer de bonnes approximations en s'écartant de ces poles, ce qui déterminera $\rho_\gamma(E)$ pour γ suffisamment grand.

On va voir plus bas que G sera évalué par des méthodes semi-classiques, du type B K W. L'intérêt d'avoir exprimé la densité de niveaux en fonction de G , en se débarrassant des fonctions d'onde individuelles Ψ_n , deviendrait alors évident: on n'aura en effet pas à se préoccuper (pour $\gamma \neq 0$) des difficultés apparaissant lorsque c'est Ψ_n qu'on cherche à déterminer par des méthodes semi-classiques (problème des caustiques et des points tournants, où Ψ passe d'un comportement oscillant, à un comportement d'onde évanescence; problème des dégénérescences ou quasi-dégénérescences des valeurs propres, qui obligent à combiner plusieurs Ψ_n approchés).

DEVELOPPEMENT EN "REFLEXIONS" MULTIPLES.

La fonction de Green de l'équation d'ondes scalaires peut se déterminer par la méthode que Neumann a employée pour résoudre le problème de Dirichlet. Soit

$$G_0(r, r'; z) = \frac{e^{i\sqrt{z}|r - r'|}}{4\pi |r - r'|} \quad (10)$$

la fonction de Green en l'absence de frontière. On cherche à représenter la fonction $G_1 = G - G_0$, solution de l'équation homogène.

$$(\Delta + z) G_1 = 0 \quad (11)$$

à l'intérieur du volume V , par des sources réparties sur la surface S . Plus précisément, on utilise une représentation en termes d'un potentiel μ de double couche

$$G_1(r, r'; z) = \int_S d\sigma_\alpha \frac{\partial G_0}{\partial n_\alpha}(r, \alpha; z) \mu(\alpha, r'; z) \quad (12)$$

G_1 satisfait automatiquement l'équation (11). La condition aux limites

$$G_1(r, r'; z) = -G_0(r, r'; z) \text{ pour } r \text{ sur } S \quad (13)$$

implique compte tenu des propriétés du potentiel de double couche (G_1 , donné par l'équation (12), présente lorsque r traverse la surface S en un point β une discontinuité $-\mu(\beta, r'; z)$), que μ est solution de l'équation intégrale sur S

$$\frac{1}{2}\mu(\beta, r'; z) + \int_S d\sigma_\alpha \frac{\partial}{\partial n_\alpha} G_0(\beta, \alpha; z) \mu(\alpha, r'; z) = -G_0(\beta, r'; z) \quad (14)$$

Cette équation est une équation de Fredholm, et le noyau peut s'itérer, conduisant à un développement convergent si ses valeurs propres sont inférieures à 1 en module. On peut montrer que c'est le cas pour γ assez grand. Le développement correspondant pour G ,

$$G(r, r'; z) = G_0(r, r'; z) - 2 \int \frac{\partial}{\partial n_\alpha} G_0(r, \alpha; z) G_0(\alpha, r'; z) \quad (15)$$

$$+ 4 \int \frac{\partial}{\partial n_\alpha} G_0(r, \alpha; z) \frac{\partial}{\partial n_\beta} G_0(\alpha, \beta; z) G_0(\beta, r'; z) - \dots,$$

se représente par une propagation de r' vers r , en passant par des points de "réflexion" (ou de diffusion) arbitraires $\alpha, \beta \dots$ sur S .

DEVELOPPEMENT ASYMPTOTIQUE. DE ρ_γ .

Si γ est assez grand, G_0 décroît exponentiellement en

$$e^{-k_i |r - r'|}, \quad (16)$$

où $z = E + i\gamma = (k_r + ik_i)^2$. La contribution dominante à $\rho_V(E)$ donnée par (9), (10), (15) est associée aux longueurs de propagation courtes (devant $1/k_i$).

Le premier terme de (15), contribuant lorsque r est n'importe où dans le domaine V , donne ainsi le terme de Weyl

$$\rho_V(E) \sim \frac{V k_r}{4\pi^2} \quad (17)$$

Le deuxième terme de (15) n'existe que si $r = r'$ est à une distance de la frontière d'ordre $1/k_i$. Il donne une contribution proportionnelle à son aire S . De plus, dans les termes suivants, la dérivée normale $\frac{\partial}{\partial n_\beta} G_0(\alpha \beta; z)$ s'annule avec la courbure de la frontière, de sorte que les termes successifs sont de plus en plus petits. On aboutit ainsi à un développement asymptotique en puissances de $1/k_i$, et valable si γ (ou k_i) est assez grand pour que les irrégularités de $\rho_V(E)$ soient lissées :

$$\rho_V(E) \sim \frac{V\sqrt{E}}{4\pi^2} - \frac{S}{8\pi} + \frac{1}{12\pi^2\sqrt{E}} \int d\sigma \frac{1}{2} \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) \dots \quad (18)$$

SUPPRESSION DU LISSAGE.

Si γ diminue, au point que les trajets de longueur $1/k_i$ atteignent les dimensions du domaine V , le développement précédent n'est plus valable. Cependant, si E est assez grand, G_0 contient une partie oscillante en

$$e^{ik_r |r-r'|} \quad (19)$$

Chaque terme du développement (15) se présente donc sous forme d'une intégrale, dont l'intégrand oscille rapidement en $e^{ik_r \ell}$, où ℓ est la longueur du chemin polygonal fermé $r \alpha \beta \dots r$ inscrit dans la frontière S . On peut calculer cette intégrale par la méthode des phases stationnaires. La contribution dominante vient alors du voisinage des chemins de longueur stationnaire L , autour desquels on développe l'intégrand.

OSCILLATIONS DE LA DENSITE DE NIVEAUX.

La procédure précédente associe à chaque chemin stationnaire L une contribution à $\rho_{\gamma}(E)$ de la forme

$$\text{Im } A e^{ikL} . \quad (20)$$

La valeur de A est calculée explicitement dans le dernier article cité en référence, qui discute en détail les divers types de chemins stationnaires.

On montre en particulier que les termes dominants de type (20) sont associés aux chemins classiques fermés, où les réflexions sur la surface S se produisent selon les lois de la mécanique classique. Chacun de ces chemins fournit donc une oscillation régulière de la densité des niveaux. L'amplitude A de cette oscillation varie lentement avec E . Dans le cas d'un domaine sphérique par exemple, elle se comporte comme $E^{V/4}$. Le terme de surface de (18) est donc plus petit que les oscillations, et on comprend qu'un lissage soit nécessaire pour supprimer ces oscillations et donner un sens aux termes successifs dans le développement asymptotique.

L'existence d'oscillations régulières dans la densité de niveaux est générale. On montre en effet qu'il existe toujours des chemins classiques fermés.

On comprend intuitivement le lien entre ces chemins et l'oscillation (20) de la densité de niveaux en le rapprochant de la vieille présentation de Bohr de la mécanique quantique : le long d'une trajectoire de longueur L , le nombre d'onde longitudinal est quantifié, par valeurs distantes de $2\pi/L$; ici par contre, les variables transverses ne se séparent pas, ce qui fournit, au lieu de niveaux discrets distants de $2\pi/L$, des paquets de niveaux ayant cet espacement.

DEVELOPPEMENT SEMI-CLASSIQUE DE LA DENSITE DE NIVEAUX.

Si la frontière S est analytique par morceaux, on peut construire $\rho_Y(E)$ comme une somme de termes associés chacun à une trajectoire classique, ce qui généralise les considérations ci-dessus à des valeurs quelconques de Y et E . Pour cela, on effectue dans le développement (15) toutes les intégrations autres que l'intégration sur la longueur l du chemin. $\rho_Y(E)$ s'exprime ainsi sous la forme

$$\rho_Y(E) = \frac{1}{\pi} \text{Im} \int dl A(l) e^{ikl}, \quad k = \sqrt{E - iY} \quad (21)$$

où $A(l)$ est une fonction analytique de la variable réelle ρ , singulière pour $l = 0$ et pour les valeurs de l égales à des longueurs de chemins stationnaires, c'est-à-dire de trajectoires classiques (ainsi que de trajectoires passant par les singularités de S).

On passe à une intégrale de contour sur des longueurs complexes

$$\rho_Y(E) = - \frac{1}{2\pi^2 R} e^{\int} d\lambda \Omega(\lambda) e^{ik\lambda}, \quad (22)$$

où

$$\Omega(\lambda) = \int dl \frac{A(l)}{\lambda - l}. \quad (23)$$

L'intégrale de contour dans (21), prise autour de l'axe réel peut se déformer vers le haut, de manière à transformer e^{ikl} en une exponentielle décroissante. L'intégrale (23) devient une somme d'intégrales associées chacune à une singularité de $\Omega(\lambda)$, donc à une trajectoire classique.

Il faut inclure ici les trajectoires classiques complexes, n'ayant pas d'interprétation physique directe, obtenues en résolvant les équations de la mécanique classique pour des positions et des temps complexes.

La contribution de chaque trajectoire de longueur L ($\text{Im } L \geq 0$) contient un facteur e^{ikL} . Si Y est grand, les temps dominants seront ceux pour lesquels $|L|$ est petit; en particulier $L = 0$ engendre les termes (18).

Si γ diminue, L peut être plus grand et on doit inclure un certain nombre de trajectoires fermées, les plus courtes. Mais, dans la mesure où E est grand, il suffit de se limiter à des trajectoires presque réelles. On en donne des exemples dans les références. Naturellement, pour $\gamma = 0$, $\rho(E)$ est une somme de distributions δ , et ne peut être reconstitué qu'en englobant une infinité de trajectoires. S'il y a convergence du développement, c'est au sens des distributions.

TEST DE LA SPHERE.

On a étudié en détail (voir référence) le cas de la sphère, pour laquelle les niveaux peuvent être exactement calculés. Une analyse harmonique montre d'abord que ces niveaux ne sont pas disposés au hasard : elle fait apparaître l'effet des pics, dont la position correspond exactement à celle des longueurs des polygones réguliers diamétraux (trajectoires classiques fermées (fig. 1)). Par ailleurs, (fig. 2) on a comparé directement $\rho_\gamma(E)$ calculé exactement avec l'expression très simple obtenue en prenant, en plus des termes non-oscillants (15), les contributions des deux polygones dominants (triangle et carré). L'accord est très satisfaisant pour $k_i R \gtrsim 0,2$, la densité de niveaux montrant clairement des oscillations régulières, avec le phénomène de battements caractéristique de l'interférence entre deux oscillations. Pour k_i plus faible, on obtient un bon accord en incluant plus de polygones. Il est à noter qu'avec une dizaine de polygones, on reproduit le comportement de $\rho_\gamma(E)$ non seulement pour E grand, mais aussi pour E petit, dans la région où $\rho_\gamma(E)$ présente des pics à chaque niveau individuel. On peut même descendre jusqu'à l'état fondamental, dont la position se retrouve ainsi avec une bonne précision !

L'analyse de la densité de niveaux en termes de trajectoires classiques, qui d'une certaine façon est "duale" de l'analyse en moments angulaires, est donc très utile : elle converge rapidement, à haute et même à

basse énergie (où elle peut être considérée comme une méthode de quantification approchée. Elle est facilement utilisable, même pour des domaines de formes arbitraires et même si on inclut des trajectoires classiques complexes, puisque la résolution numérique d'une équation différentielle (même dans les complexes) est beaucoup plus simple que celle de l'équation aux dérivées partielles (1) .

AUTRES APPLICATIONS.

La méthode semi-classique employée ci-dessus pour déterminer approximativement la fonction de Green peut servir non seulement à la détermination de la densité de niveaux, mais de toute autre quantité reliée directement à la fonction de Green, par exemple une réponse linéaire acoustique. P. Bouche (*) a étudié ainsi la densité $d(r)$ de matière nucléaire de noyaux finis, qui s'exprime en fonction de $G(r, r', z)$. Les termes dominants sont ici, non les trajectoires fermées, mais les trajectoires partant de r et y aboutissant. Ici encore, l'étude des noyaux sphériques montre qu'il suffit de quelques trajectoires classiques pour reproduire la densité de matière, avec ses oscillations associées aux couches.

EQUATION DE SCHRODINGER.

Bien qu'on ne dispose pas ici d'un point de départ aussi simple que (15), les résultats précédents restent valables. Pour γ grand, l'équivalent du développement asymptotique (18) est l'approximation de Thomas Fermi et ses corrections, obtenues en développant, dans l'évaluation de la fonction de Green au voisinage d'un point, le potentiel $V(r)$ autour de sa valeur en ce point.

Pour γ plus petit, on retrouve les oscillations de $\rho_\gamma(E)$ associées aux trajectoires classiques (réelles et complexes), en partant de l'expression de Feynmann de G en intégrale fonctionnelle, et en lui appliquant

(*) Nuclear Physics, A, à paraître (1972).

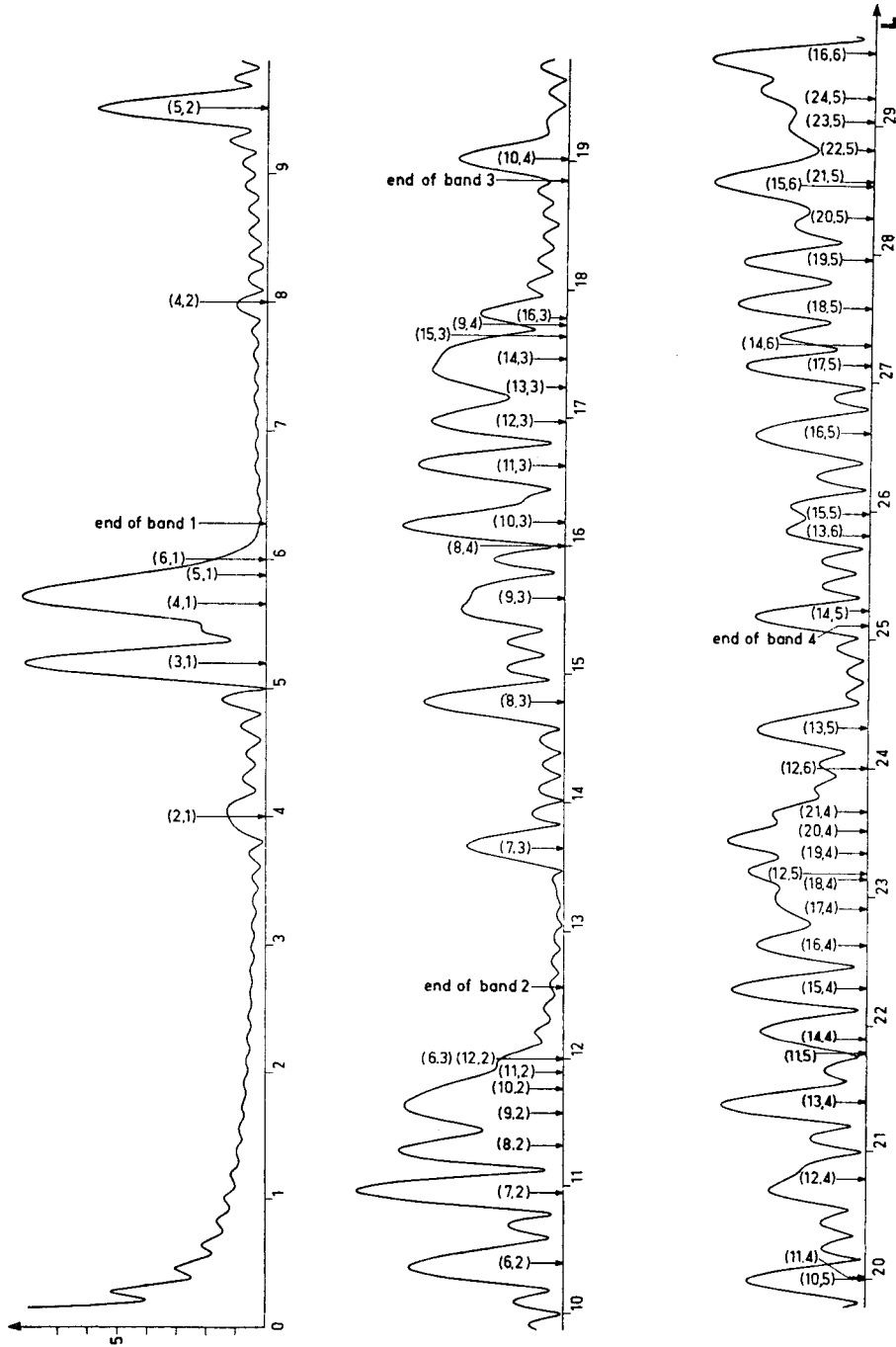
(de façon mathématiquement non justifiée cette fois) la méthode des phases stationnaires. On peut cependant considérer l'approximation semi-classique ainsi obtenue,

$$G_{c\ell} = \sum_j A_j e^{i S_j}, \quad (24)$$

où S_j est l'intégrale d'action le long de l'une des trajectoires classiques (complexes) j allant de r' à r avec l'énergie z , comme le point de départ d'une méthode de perturbations pour G , et calculer les corrections, ce qui justifie a posteriori l'approximation.

On voit ainsi apparaître, comme pour l'équation d'ondes, des oscillations régulières dans la densité de niveaux, que l'on peut calculer à partir de l'expression (24), mais de nouveaux travaux sont nécessaires afin d'assurer de façon plus solide les bases mathématiques de la théorie.

Figure 1



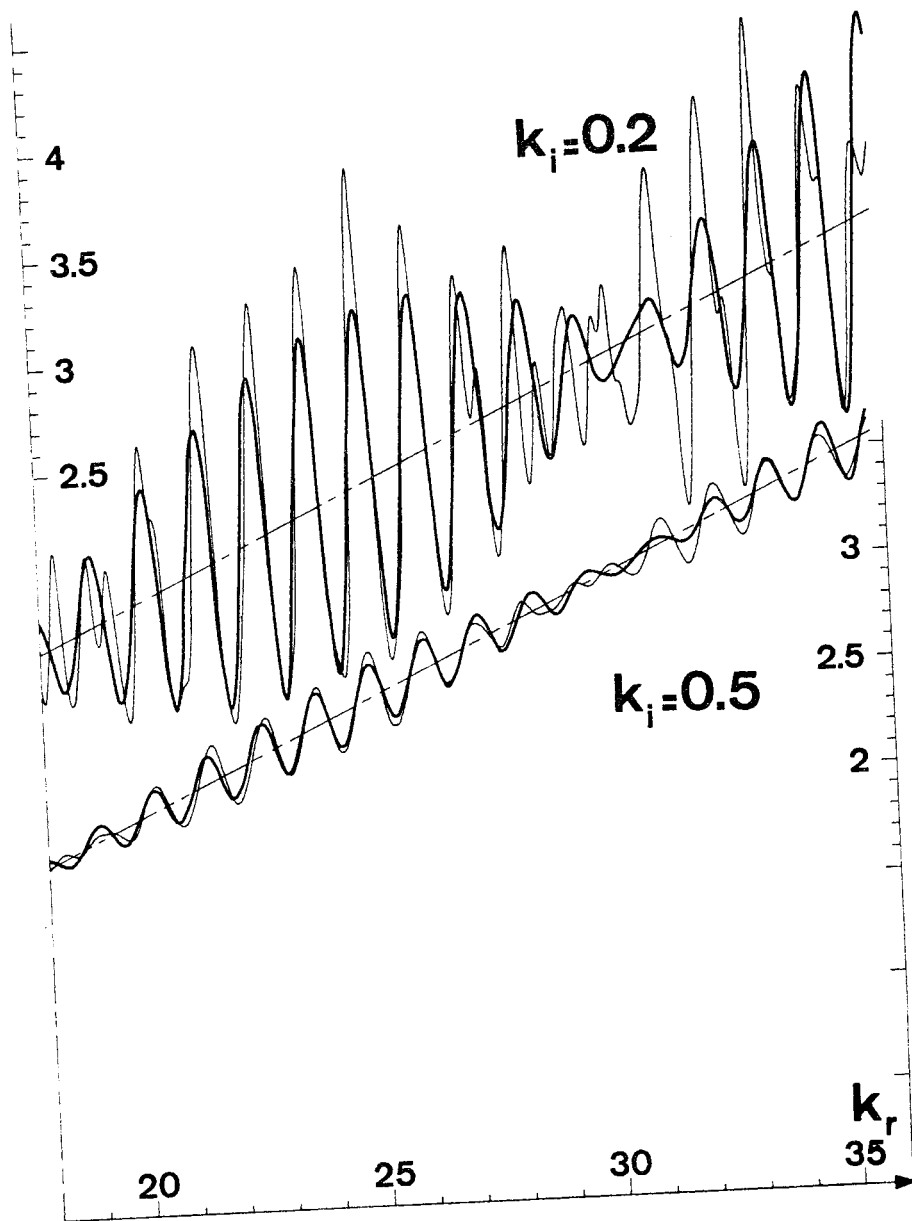


Figure 2

